

以下の問1、2に解答せよ。ただし、アボガドロ数 $N_A = 6.02 \times 10^{23}$ とし、有効数字3桁で単位も含めて解答すること。

問1. ある有機化合物のモル質量は 250 g mol^{-1} であり、この分子の結晶が斜方晶であるとする。

- ① 結晶格子定数が $a = 900 \text{ pm}$, $b = 950 \text{ pm}$, $c = 800 \text{ pm}$ であるとする、単位胞の体積はいくらか計算せよ。
- ② 単位胞にこの分子が2個入っている。この結晶の密度はいくらになるかを計算せよ。
- ③ この結晶の $\{112\}$ 面の面間隔を計算せよ。
- ④ 波長 154 pm のX線を用いてこの結晶の粉末X線回折測定を行った場合、この結晶の $\{112\}$ 面に対応する回折ピークが観測される角度 2θ を計算せよ。

$$\textcircled{1} \quad V = abc = 900 \text{ pm} \times 950 \text{ pm} \times 800 \text{ pm} = \mathbf{6.84 \times 10^8 \text{ pm}^3}$$

$$\textcircled{2} \quad \rho = (2 \times 250 \text{ g mol}^{-1} / 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) / (6.84 \times 10^{-22} \text{ cm}^3) = \mathbf{1.21 \text{ g cm}^{-3}}$$

$$\textcircled{3} \quad \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad \text{より} \quad \frac{1}{d_{210}^2} = \frac{1^2}{(900 \text{ pm})^2} + \frac{1^2}{(950 \text{ pm})^2} + \frac{2^2}{(800 \text{ pm})^2} = 8.59 \times 10^{-6} \text{ pm}^{-2}$$

$$\therefore d_{210} = \mathbf{341 \text{ pm}}$$

$$\textcircled{4} \quad \lambda = 2d \sin \theta \quad \text{より} \quad \theta = \sin^{-1} \frac{\lambda}{2d} = \sin^{-1} \frac{154 \text{ pm}}{2 \times 341.1 \text{ pm}} = 13.05^\circ$$

$$\therefore 2\theta = \mathbf{26.1^\circ}$$

問2. hcp構造を有している鉄の結晶について、鉄の原子半径を 126 pm とすると、原子1個の収容体積はいくらになるか計算せよ。また、鉄の原子量を 55.9 として、hcp構造の鉄の密度を計算せよ。

$$\text{収容体積は} \quad V = \frac{4}{3} \pi (126 \text{ pm})^3 \div 0.74 = \mathbf{1.13 \times 10^7 \text{ pm}^3}$$

$$\text{密度は} \quad \rho = (55.9 \text{ g mol}^{-1} / 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) / (1.13 \times 10^{-23} \text{ cm}^3) = \mathbf{8.22 \text{ g cm}^{-3}}$$